

Résumé

En utilisant la méthode de premiers principes, nous étudions les propriétés électroniques et magnétiques des semi-conducteurs magnétiques dilués $Zn_{1-x}Mn_xO$ et $Cd_{1-x}Mn_xO$ avec $x=25\%$. Les calculs sont effectués par la méthode des ondes planes linéairement augmentées (FP-LAPW) basée sur la théorie de la fonctionnelle de la densité.

Comme potentiel d'échange-corrélation nous avons utilisé la nouvelle approximation du gradient généralisé GGA. Les propriétés structurales sont déterminées à partir des calculs d'énergies totales. Premièrement, nous avons utilisé l'approximation de gradient généralisé (GGA) pour étudier les propriétés structurales et électroniques du ZnO et CdO pur dans la phase wurtzite. Les résultats obtenus sont en bon accord avec les valeurs rapportées dans la littérature. Nous montrons que l'énergie de cohésion du $Zn_{0.75}Mn_{0.25}O$ et $Cd_{0.75}Mn_{0.25}O$ dépasse celle des éléments parents ZnO et CdO. Nous discutons la structure électronique, les densités d'états totales et partielles et les moments locaux. Nous avons calculé l'énergie de séparation d'échange de spin des états 3d-Mn $\Delta_x(d)$, qui reflètent le potentiel effectif de spin majoritaire et spin minoritaire. D'après les calculs des densités de charge, nous étudions la nature de la liaison et l'effet des états 3d-Mn sur ces densités. Dans ces systèmes, l'énergie d'échange p-d joue un rôle important pour propriétés caractéristiques.

Abstract

Using the first-principles method we investigate the electronic and magnetic properties of the diluted magnetic semiconductors $Zn_{1-x}Mn_xO$ and $Cd_{1-x}Mn_xO$ with $x = 25\%$. The calculations are performed by a developed full-potential augmented wave (FP-LAPW) method within the spin density functional theory. As exchange-correlation potential we used the new generalized gradient approximation GGA form. Structural properties are determined from the total energy calculations. First, we use the generalized gradient approximation (GGA) to investigate the structural and electronic properties of the wurtzite phase of pure ZnO and CdO. We show that our calculated values were in good agreement with values reported in the literature.

We show that the cohesive energy of $Zn_{0.75}Mn_{0.25}O$ and $Cd_{0.75}Mn_{0.25}O$ exceeds that of the parent elements ZnO and CdO. We have calculated the 3d-Mn spin-exchange splitting energies $\Delta_x(d)$, which reflect the effective potential of the majority and the minority spin. From the charge spin densities, we study the nature of the liaison and the effect of Mn-3d. In these systems the p-d exchange interaction between free electrons (holes) and localized magnetic moments plays an important role for their characteristic properties.

ملخص

إستعملنا طريقة المبدأ الأول ، ودرسنا الخواص الإلكترونية و المغناطيسية لشبه النواقل المغناطيسية $Zn_{1-x}Mn_xO$ و $Cd_{1-x}Mn_xO$ مع $x = 25\%$. الحسابات أجريت بواسطة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا (FP-LAPW) المرتكزة على نظرية DFT. لكمون التبادل والإرتباط إستخدمنا الطريقة التقريبية GGA. الخواص البنوية إستنتجت إنطلاقا من حساب الطاقة الكلية. أولا إستعملنا الطريقة التقريبية GGA في دراسة الخواص البنوية والكهربائية للمركب ZnO و CdO في صبغته المستقرة wurtzite. تحصلنا على نتائج موافقة تقريبا للنتائج التجريبية و النظرية الأخرى. كذلك وجدنا أن طاقة الإرتباط في $Zn_{1-x}Mn_xO$ و $Cd_{1-x}Mn_xO$ تتجاوز طاقة الإرتباط في المركبات الثنائية ZnO و CdO. لقد تحدثنا عن البنية الإلكترونية وكثافة الحالة (الإلكترونات) الكلية و الجزئية و العزوم المغناطيسية المحلية. لقد حسبنا طاقة التبادل لسيبين (spin) الحالات 3d-Mn $\Delta_x(d)$, التي تعكس الكمون المنتج لسيبين الأكثر و سيبن الأقل. في هذه النظام طاقة التبادل p-d تلعب دور مهم في الخواص المميزة.